



TITLE:

19. 水銀カルコゲナイドの高圧下における相転移(大阪大学基礎工学部物性分野,修士論文アブストラクト(1981年度))

AUTHOR(S):

清家, 忠義

---

CITATION:

清家, 忠義. 19. 水銀カルコゲナイドの高圧下における相転移(大阪大学基礎工学部物性分野,修士論文アブストラクト(1981年度)). 物性研究 1982, 38(3): 137-138

ISSUE DATE:

1982-06-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/90716>

RIGHT:

している事が明らかになった。

次に Pd 濃度が 40at % から 60at % の領域では,  $L1_0$  型 FePd 規則相が存在する。電顕観察を中心にその規則化過程を調べると, 表面近傍での規則化が先に進行し, そこでは規則相との境界に misfit 転位が導入される。その後内部での規則化に伴ない {110} 双晶が出現し, 逆位相境界も生じる。その過程は, 規則化の開始と共に, 立方晶の地の中に核形成した正方晶規則相が成長し, その正方歪を解放する為, {110} 双晶が導入され, その後双方の領域内で第一種のずれを持った逆位相境界の出来ていく事がわかった。一方, 従来の研究で未解決のまま残されていた, 規則化に伴ないメスバウアースペクトルに 380 kOe 程度の大きな内部磁場を持つ成分が出現する原因については, 短範囲に fcc Fe に近い原子配列を持った領域が取り残された為である事が明らかとなった。

## 19. 水銀カルコゲナイドの高圧下における相転移

清 家 忠 義

Si, Ge 等の IV 族半導体や III-V, II-VI 化合物半導体は, 常圧では正四面体配位構造をとる。この構造は低密度であるので, 高圧下ではより高密度な構造へと相転移する。

HgTe, HgSe は常圧では, とともに半金属の ZnS 構造である。加圧するとそれぞれ 13 kbar, 7 kbar で半導体の HgS 構造へと相転移する。高圧下における HgTe, HgSe の今までの研究はすべて ZnS 構造 (半金属) から HgS 構造 (半導体) への相転移に関係するものであった。ところで, III-V, II-VI 化合物半導体の他の例からさらに高い圧力下では, 半導体から金属への相転移が予想される。

そこで, 我々は HgTe, HgSe の圧力誘起の相転移現象を, 抵抗率の圧力依存性の測定, 高圧下における電気抵抗の温度依存性の測定, ならびに高圧 X 線回折実験によって 200 kbar まで調べた。

本研究によって, 以下に述べる 4 つのことが明らかになった。(1) 半導体相である HgS 構造は, HgTe では 15 kbar から 80 kbar まで, HgSe では 10 kbar から 150 kbar まで続く。また, このときのエネルギーギャップの最大値およびその圧力係数 ( $dE_g/dP$ ) は HgTe については 0.71 eV,  $-15.3 \text{ meV/kbar}$ , HgSe については 0.79 eV,  $-15.9 \text{ meV/kbar}$  である。

(2) HgTe, HgSe とともにそれぞれ 84 kbar, 150 kbar で初めて金属的になり, そのときの結

晶構造は NaCl 型である。(3) HgTe は 120 kbar でさらに, NaCl 構造から別の構造へと相転移する。なお, このときも電氣的には金属的である。(4) HgSe は 140 kbar から 160 kbar , 100 °C 以上において新しい半導体相の存在する可能性がある。

## 20. 固体 Xe の金属化の非経験論的研究

### — H C P 構造について —

得 居 康 男

Nelson, Ruoff によって固体 Xe の金属化が 330 kbar の圧力で起こることが観測された。

その後の詳しい実験によると, 圧力 360 kbar で電気抵抗値  $R$  は 5 桁急減し, その後  $\log R$  は圧力にはほぼ比例して減少する。比抵抗値が約  $10^2 \mu \Omega \text{cm}$  で金属になるとすると, 固体 Xe は結晶構造の転移を経た後, 約 550 kbar で連続的に金属になることが予想される。

最近 Ray と Trickey 及び Christensen による理論的研究があるが, 実験を説明するに至らず, また hcp の可能性が見落されている。

我々は hcp 構造について, Local-density functional 法を用いて core electron 及び 5s, 5p の valence electron を, それぞれ atom-like 及び SAPW を用いて self-consistent に計算をした。 $T=0$  における Gibbs の自由エネルギーをこれまで求められている fcc 及び bcc の値と比較して, 安定な結晶構造を議論する。

またエネルギー・バンド・ギャップにおけるスピン-軌道相互作用の効果も議論する。

## 21. Cu-Sn 合金のオメガ変態とマルテンサイト変態

谷 本 益 久

Cu-Sn 合金の  $\beta$  相は不規則 bcc 構造で室温に急冷すると  $\text{DO}_3$  型規則格子 ( $\beta_1$  相) に転移する。しかしながら, 一般にはその電子回折像に規則格子斑点以外に顕著な散漫散乱を伴った異常回折斑点が出現する。これは急冷相が単純な  $\text{DO}_3$  型規則構造のみではないことを示し, これらの異常回折斑点及び散漫散乱の原因については種々の説があるが, まだ解っていない。